

水素と水のクラスターに関する理論的研究

¹長崎西高校, ²岐阜大・地域科学, ³慶大・理工
○斉藤暖人¹, 中尾一心¹, 雪野真慧¹, 権藤好信¹, 橋本智裕², 岩田末廣³

Theoretical Study of Hydrogen and Water Cluster

○Haruto Saito¹, Isshin Nakao¹, Yukino Masato Yoshinobu Gondoh¹,
Tomohiro Hashimoto², Suehiro Iwata³
¹Nagasaki Nishi High school, Japan
² Department of Regional Studies, Gifu Univ, Japan
³ Department of chemistry, Keio Univ, Japan

【Abstract】

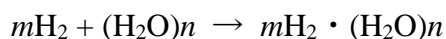
It is said that “hydrogen water” has good effects for our health and beauty^[1]. So we were interested in it and had a doubt that it truly existed or not. Because solubility of hydrogen molecule in water is 1.6mg/L^[3] and the figure is very small. We searched the internet for the structure of “hydrogen water” and found a site^[2] which claims that the “hydrogen water” exists in the form of H₁₄O. Obviously, the structure is impossible to exist because an oxygen atom has two unpaired electrons. Nonpolar molecules are also difficult to dissolve in polar solvent. Therefore, we examined the interaction between hydrogen molecule and water clusters, and computed how much binding energies they have.

【序】

水素水は私たちの健康や美容にいい^[1]とされている。そこで私たちは水素水に興味を持ち、本当に存在するかどうか疑問を抱いた。なぜなら水素の水に対する溶解度は1.6mg/Lと非常に小さいためである。そこでインターネットで水素水の構造について調べてみたところ H₁₄O という形で存在しているとされていたが^[2],酸素原子の対電子は2つのため有り得ない。また極性溶媒に無極性分子が溶けにくいということから考えても、有り得にくいことである。そこで、水素と水クラスターの相互作用について調べ、水素と水のクラスターが安定して存在し得るかについて量子化学計算を行った。

【方法 (実験・理論)】

本研究では下記の反応：



において、MP2法を用いて構造最適化を行った。基底関数はO原子には aug-cc-pVDZ または aug-cc-pVTZ, H原子には cc-pVDZ または cc-pVTZ を使用し、計算ソフトとして石村の Smash を使用した。

また aug-cc-pVDZ, cc-pVDZ においては LPSPT法を用いて相互作用の解析も行い計算ソフトとして molyx を使用した。

六量体以降については構造異性体が多く考えられ最安定といえる構造発見のためにモンテカルロ法を用いた。

<モンテカルロ法について>

乱数を用いて構造を一時的に決定し温度 25°Cにおいて計算を 1000 回行った。

基底関数は mp2/6-31g**で計算ソフトとして GAMESS を用いた。

<相互作用の解析について>

BSSE・分散力（以降 Disp）の補正つまり基底関数欠損誤差と分子間力による安定化エネルギーの過大評価を計算で求め補正したものである。

【結果・考察】

主なクラスタの構造は次のようになる。

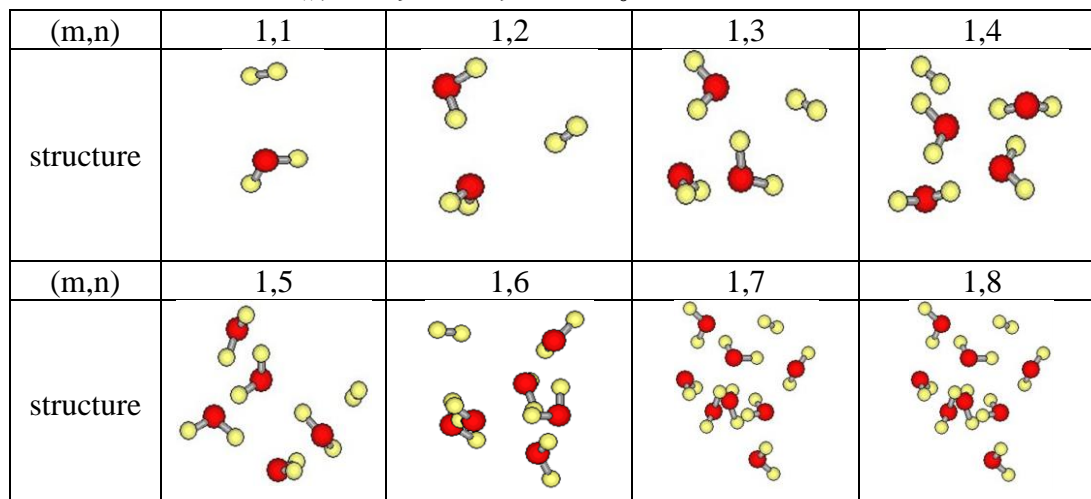


Figure 1 Structure of hydrogen molecule and water cluster

Basic Function \ (m,n)	(1,1)	(1,2)	(1,3)	(1,4)	(1,5)	(1,6)	(1,7)	(1,8)
pVDZ	-2.3	-2.0	-2.8	-2.8	2.9	-3.3	-4.2	-6.2
pVDZ (BSSE・Disp correction)	1.4	2.8	3.4	4.0	9.5	2.9	188.7	0.13
pVTZ	-5.31	-8.39	-12.33	-16.02	-14.51	-	-	-

Table1 Binding energy (kJ)

水素と水のクラスタ間の結合エネルギーは Table に示す通りである。

基底関数が pVDZ の時の計算については $H_2 \cdot (H_2O)_5$ を除いて水クラスタを形成したほうが安定となる。

基底関数が pVTZ の時の計算については $H_2 \cdot (H_2O)_6$ においてより安定といえる構造をみつけきれておらず、 $H_2 \cdot (H_2O)_7$, $H_2 \cdot (H_2O)_8$ においては pVDZ より各段に計算コストが高く計算がまだできていない。

また BSSE・Disp 補正を加えたデータを分析すると、ほぼ不安定であるため水素と水のクラスタの形成は難しい。

さらに【序】で述べた通り水 1 L における水素分子の^[3]常温常圧での溶解度は 1.6 mg と非常に小さく、これは 1 分子を水和するために約 7 万個の水分子が必要なことを意味する。このことから水素と水のクラスタの形成は難しい。またより大きなクラスタについても研究していく必要がある。

【参考文献】

[1] <https://ja.wikipedia.org/wiki/水素水>

[2] <http://www.h14o.com/process/manufacture.html>

[3] 第一学習社 スクエア最新図説化学